Gutzwiller 変分波動関数を用いた 1 次元電子系のトポロジカル相転移の解析

中村研究室　　大西祐介

ひねり演算子 $\hat{U} = \exp(2\pi\mathrm{i}/L\sum_j jn_j)$ の基底状態での期待値 z_L は多体量子系のトポロジカル相を特徴づける指標となることが知られており、その性質と応用に関する研究が近年、盛んに行なわれている。本研究では重心電荷の座標によって分極の仕方を特徴づける [1] ということに着目しその相転移現象について議論する。この指標を用いて最近接サイトへの飛び移り $(-t)$、オンサイトの相互作用 (U)、最近接サイト間の相互作用 (V) を考慮に入れた模型である 1 次元拡張ハバード模型、

$$H = -t\sum_j \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow}(c^\dagger_{j\sigma}c_{j+1\sigma} + \mathrm{H.c.}) + U\sum_j n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} + V\sum_j (n_{j\uparrow}+n_{j\downarrow})(n_{j+1\uparrow}+n_{j+1\downarrow})$$

においてスピン密度波相 (SDW) と電荷密度波相 (CDW) の間にボンド秩序波相 (BOW) が存在することが、厳密対角化法を用いた z_L の計算から示されている [2]。BOW 相の存在は拡張ハバード模型においては $U = 2V$ 付近で電荷自由度の Gaussian 型転移とスピン自由度の BKT 転移が独立に起きることによる。

摂動論を用いて電荷とスピン自由度に対する $z_{\nu,L}(\nu = \rho, \sigma)$ の計算を行うと、摂動の 1 次では両者が 0 となる点はどちらも $U = 2V$ とすることから、2 次摂動以上の電子相関効果で BOW 相が安定化することが示唆される。そこでサイトごとのアップスピンとダウンスピンの 2 重占有数により相関のない状態に重みをつけた Gutzwiller 型の変分波動関数 [3] を用いた多変数変分モンテカルロ計算 (mVMC[4]) を行った。その結果は図 1 のように $z_{\rho,L} = 0$,$z_{\sigma,L} = 0$ となる位置がずれ BOW 相が現れることが確認できた。さらにひねり演算子の励起状態での期待値 $z^{q,\pm}_{\nu,L}$ について転移点で $z^{q,\pm} = \pm 1/2$ の不連続な変化をするということが議論されているが [5]、これについても変分モンテカルロ法による計算で、図 2 のように同様な結果を得られることがわかった。

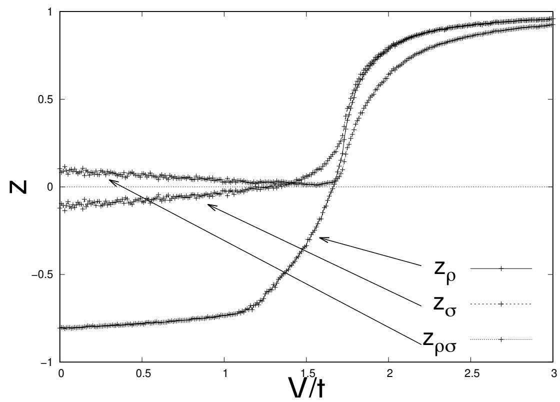

図 1: サイト数 $L = 30$,$U = 3$ のときの z_L の V 依存性

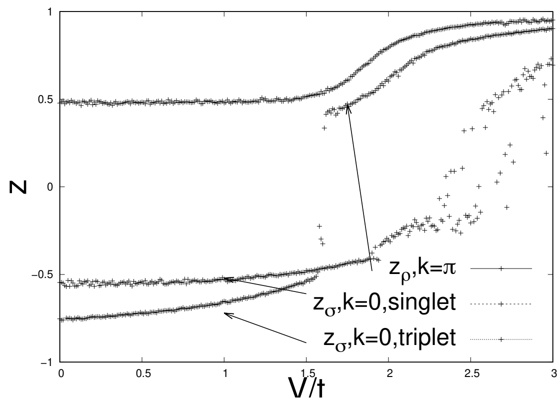

図 2: サイト数 $L = 30$,$U = 3$ のときの $z^{q,\pm}_L$ の V 依存性

[**1**] R. Resta, Phys. Rev. Lett **80**, 1800 (1997)

[**2**] M. Nakamura and J. Voit, Phys. Rev. B **65**, 153110 (2002)

[**3**] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. B **137**, A1726 (1965)

[**4**] http://ma.cms-initiative.jp/en/application-list/mvmc

[**5**] M. Nakamura and S. C. Furuya, arXiv:1807.02864